

Aprendizaje no Supervisado

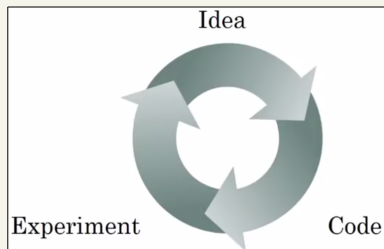
Taller de Procesamiento de Señales

Agenda

- 1 Autoencoders
- 2 Principal Components Analysis (PCA)
- 3 K-Means
- 4 Algoritmo EM
- 5 Factor Analysis

Aprendizaje Estadístico

- No se conoce la verdadera estadística.
- Se aprende por medio de datos.
- El buen desempeño no debe limitarse a los datos conocidos.

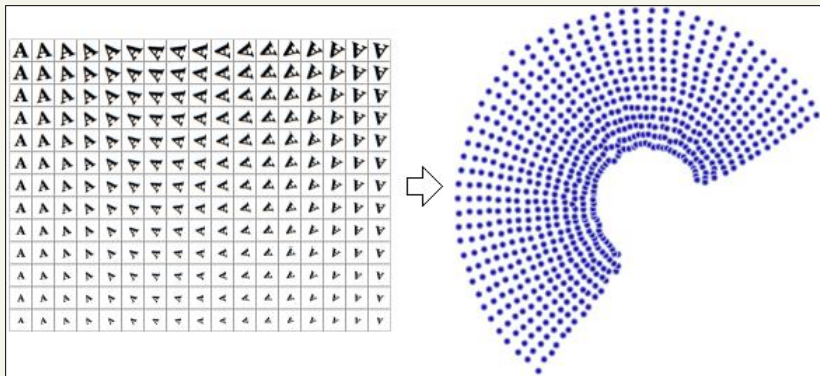


TIPOS DE APRENDIZAJES

- Aprendizaje supervisado: Cuento con pares de datos $\{(\mathbf{x}^{(i)}, y^{(i)})\}_{i=1}^n$.
- Aprendizaje no supervisado: Cuento solamente con datos $\{\mathbf{x}^{(i)}\}_{i=1}^n$.
- Aprendizaje semi-supervisado: Cuento con muchos datos no supervisados y unos pocos supervisados.

Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?



Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

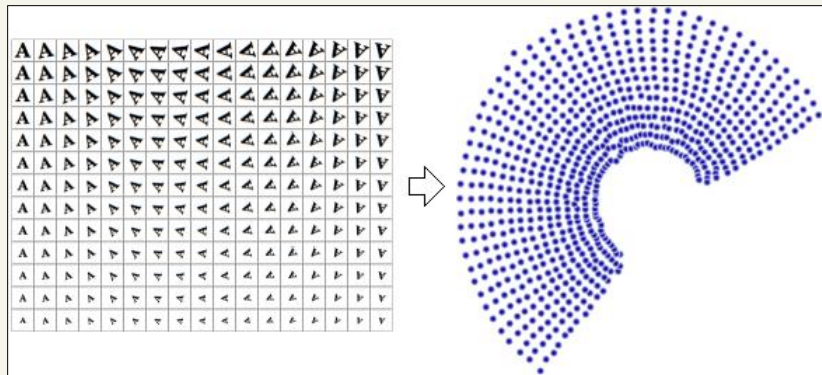
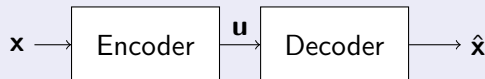


Diagrama en bloques de un Autoencoder



Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

Objetivo

Hay que entender que el objetivo no es simplemente reconstruir los datos. Sino que es reconstruir los datos a partir de una representación relevante para explicar algún fenómeno o resolver otra tarea. Si no se reconocen patrones en la naturaleza de los datos no hay aprendizaje.

Mathematical Snippets - "An unexpected bijection between the real plane and the real line" <https://www.youtube.com/watch?v=XcMZsF4vDbo>

Manifold

¿Cuál es la dimensión efectiva de los datos?

Objetivo

Hay que entender que el objetivo no es simplemente reconstruir los datos. Sino que es reconstruir los datos a partir de una representación relevante para explicar algún fenómeno o resolver otra tarea. Si no se reconocen patrones en la naturaleza de los datos no hay aprendizaje.

Cuidado!

Existen transformaciones $\mathcal{T} : \mathbb{R}^{d_x} \rightarrow \mathbb{R}$ biyectivas (googlear por ejemplo Teorema de Cantor-Schröder-Bernstein). Pero las representaciones reducidas obtenidas de esta manera pueden no ser interesantes. Hay que tener en cuenta la precisión del computo y, sobre todo, la aplicación en la que se va a utilizar.

Mathematical Snippets - "An unexpected bijection between the real plane and the real line" <https://www.youtube.com/watch?v=XcMZsF4vDbo>

Manifold

Regularización de autoencoders

Bajo ECM para
cualquier tipo
de entrada



Bajo ECM para
los sets de entre-
namiento y testeo



Bajo ECM
solamente
en el set de
entrenamiento

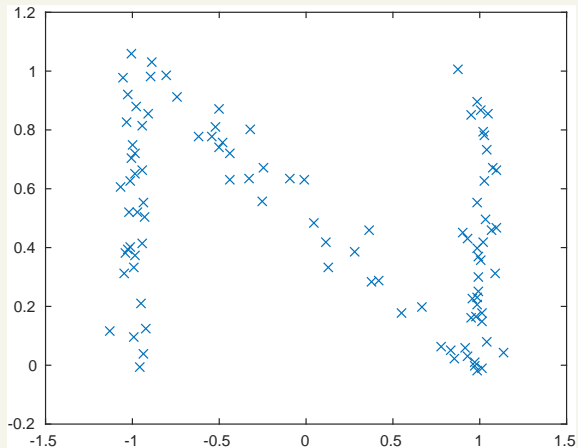


Objetivo

No quiero memorizar el conjunto de datos ni aprender una transformación biyectiva: Busco aprender el manifold. La regularización en un autoencoder busca balancear estos conceptos.

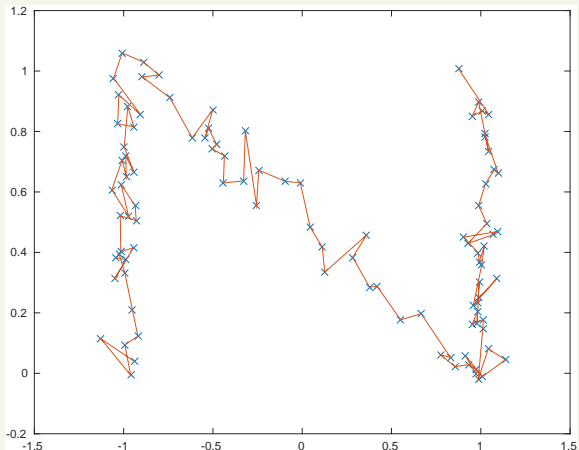
Manifold

Regularización de autoencoders



Manifold

Regularización de autoencoders



OVERFITTING

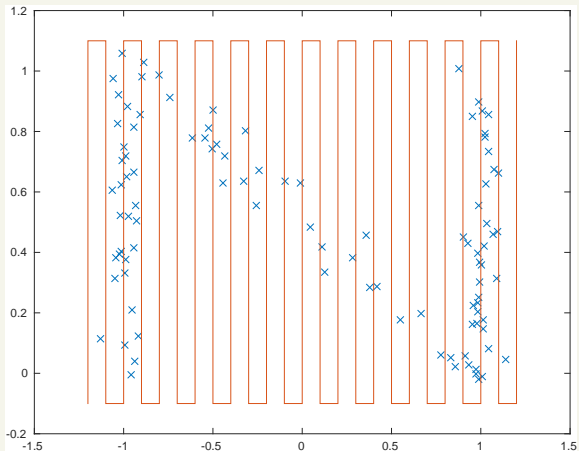
No hay aprendizaje, se están memorizando las muestras.



Necesito regularización

Manifold

Regularización de autoencoders



IDENTIDAD

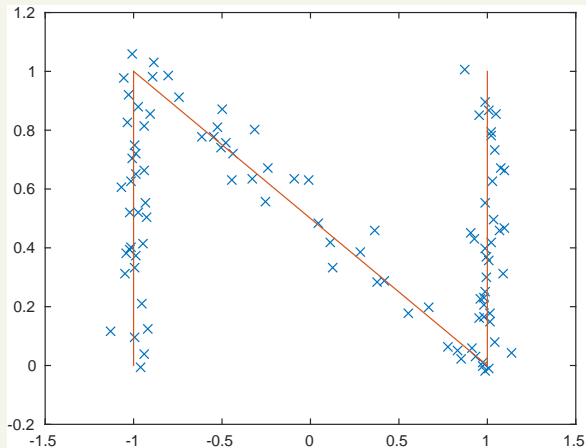
Se está aprendiendo la función identidad y no la naturaleza de los datos.



Necesito regularización

Manifold

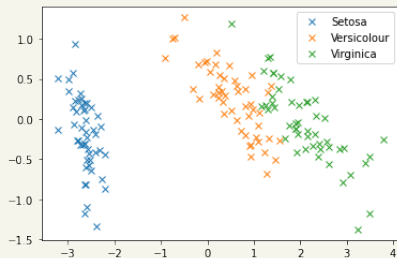
Regularización de autoencoders



Algunas Aplicaciones

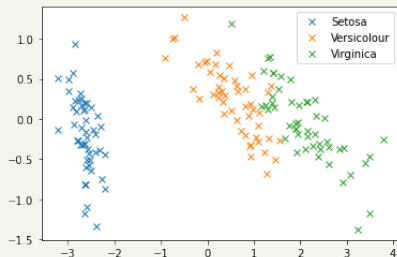
- Para efectuar una inferencia más precisa
- Para pre-procesar los datos
- Para detectar anomalías

Inferencia

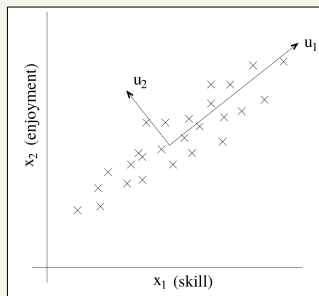


Visualizar en un gráfico 2d o 3d para explicar algunos fenómenos (iris dataset)

Inferencia



Visualizar en un gráfico 2d o 3d para explicar algunos fenómenos (iris dataset)

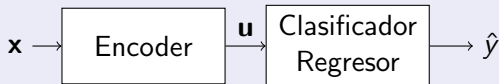


Generar alguna métrica que combine variables muy distintas entre si (radio-controlled helicopters)

Pre-processing

Preprocessing: Opción 1

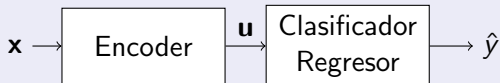
Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



Pre-processing

Preprocessing: Opción 1

Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



Preprocessing: Opción 2

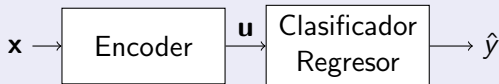
Entrenar el autoencoder y luego usar las reconstrucciones para entrenar el clasificador.



Pre-processing

Preprocessing: Opción 1

Entrenar el autoencoder y luego usar las muestras en el espacio latente para entrenar el clasificador/regresor.



Preprocessing: Opción 2

Entrenar el autoencoder y luego usar las reconstrucciones para entrenar el clasificador.



Semi-supervise learning

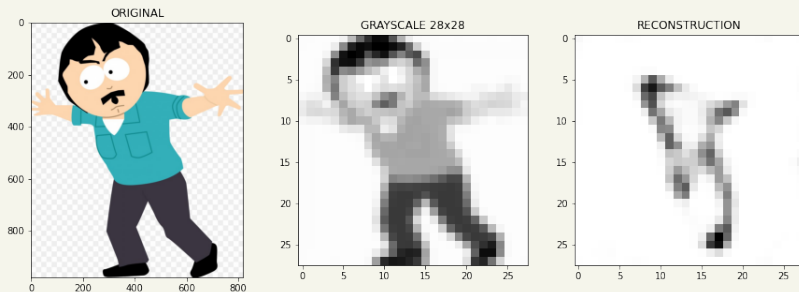
Puedo usar las muestras no supervisadas para entrenar el autoencoder y las supervisadas para el clasificador o el regresor final.

Detección de anomalías

Paradigma

Durante el entrenamiento un autoencoder aprende patrones en los datos para reconstruirlos con cierta facilidad. Entonces es de esperar que una muestra que no cumpla los patrones aprendidos sea más difícil de reconstruir.

EJEMPLO AUTOENCODER ENTRENADO CON MNIST:



¿Cuándo usar un autoencoder?

Clasificación de las aplicaciones

Las aplicaciones de los autoencoders se dividen en dos grupos:

- Las que son relevantes por si mismas.
- Las que son un paso intermedio hacia una tarea de clasificación o regresión. ← **¿Siempre servirá?**

¿Cuándo usar un autoencoder?

Clasificación de las aplicaciones

Las aplicaciones de los autoencoders se dividen en dos grupos:

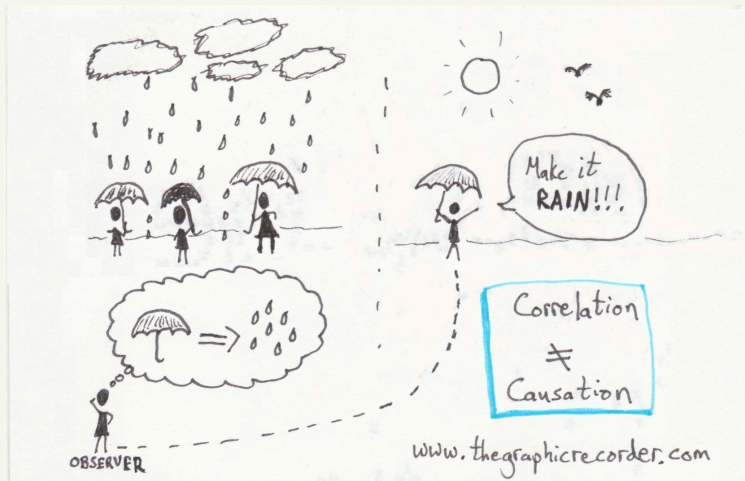
- Las que son relevantes por si mismas.
- Las que son un paso intermedio hacia una tarea de clasificación o regresión. ← **¿Siempre servirá?**

¿Que distribución aprende durante el entrenamiento?

Desde un punto de vista probabilístico, el entrenamiento de un algoritmo busca aprender la distribución estadística (total o parcial) de los datos:

- **Aprendizaje supervisado:** Para cada entrada x , se desea aprender parte de la información contenida en la distribución de una variable objetivo $Y|X = x$.
- **Aprendizaje no supervisado:** Toda la información aprendida estará contenida en distribución de los datos X .

Hablemos de causalidad



Causalidad: ¿Quién causa a quién?

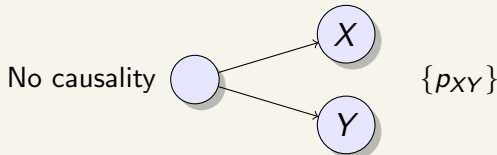
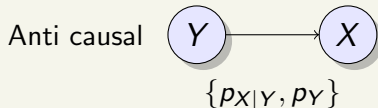
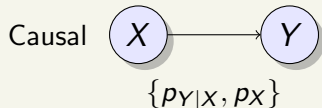
Independent Causal Mechanisms (ICM) Principle

The causal generative process of a system's variables is composed of autonomous modules that do not inform or influence each other. In the probabilistic case, this means that the conditional distribution of each variable given its causes (i.e., its mechanism) does not inform or influence the other mechanisms.

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

Independent Causal Mechanisms (ICM) Principle

The causal generative process of a system's variables is composed of autonomous modules that do not inform or influence each other. In the probabilistic case, this means that the conditional distribution of each variable given its causes (i.e., its mechanism) does not inform or influence the other mechanisms.



Causalidad: ¿Quién causa a quién?

Causalidad

Consideramos que X causa a Y si $Y = g(X, U)$ con X y U independientes. A su vez, consideramos que Y causa a X si $X = g(Y, U)$ con Y y U independientes.

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

Causalidad

Consideramos que X causa a Y si $Y = g(X, U)$ con X y U independientes. A su vez, consideramos que Y causa a X si $X = g(Y, U)$ con Y y U independientes.

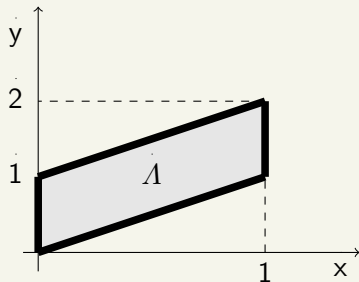
La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$



$$(X, Y) \sim \mathcal{U}(\Lambda)$$

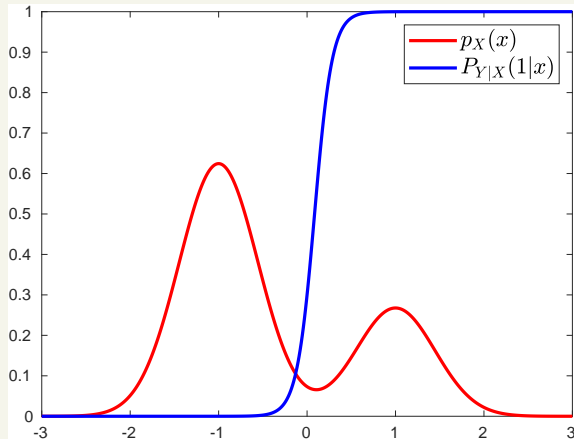
$$Y|X = x \sim \mathcal{U}(x, x + 1) \equiv x + \mathcal{U}(0, 1)$$

$$X|Y = y \sim \begin{cases} \mathcal{U}(0, y) & 0 < y < 1 \\ \mathcal{U}(y - 1, 1) & 1 < y < 2 \end{cases}$$

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$



$$Y \sim \text{Cat}\{-1, 1\}$$

$$X|Y = y \sim \mathcal{N}(y, \sigma^2)$$

$$X \sim p_X$$

$$Y|X = x \sim P_{Y|X}(y|x)$$

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

$$\begin{aligned} p_{XY}(x, y) &= e^{-x} \mathbb{1}\{0 < y < x\} \\ &= \underbrace{xe^{-x} \mathbb{1}\{x > 0\}}_{p_X(x)} \underbrace{\frac{1}{x} \mathbb{1}\{0 < y < x\}}_{p_{Y|X}(y|x)} \\ &= \underbrace{e^{-(x-y)} \mathbb{1}\{x > y\}}_{p_{X|Y}(x|y)} \underbrace{e^{-y} \mathbb{1}\{y > 0\}}_{p_Y(y)} \end{aligned}$$

Causalidad: ¿Quién causa a quién?

La estadística no basta!

Para toda conjunta p_{XY} siempre existe $U \perp X$ y $g(\cdot, \cdot)$ tal que $Y = g(X, U)$

$$\begin{aligned} p_{XY}(x, y) &= e^{-x} \mathbb{1}\{0 < y < x\} \\ &= \underbrace{xe^{-x} \mathbb{1}\{x > 0\}}_{p_X(x)} \underbrace{\frac{1}{x} \mathbb{1}\{0 < y < x\}}_{p_{Y|X}(y|x)} \\ &= \underbrace{e^{-(x-y)} \mathbb{1}\{x > y\}}_{p_{X|Y}(x|y)} \underbrace{e^{-y} \mathbb{1}\{y > 0\}}_{p_Y(y)} \end{aligned}$$

$$Y = X \cdot \mathcal{U}(0, 1), \quad X = Y + \mathcal{E}(1)$$

Causal and Anticausal Learning

Causal Learning

Desde esta perspectiva, en una configuración causal $X \rightarrow Y$ no debería ayudarnos conocer p_X a inferir $p_{Y|X}$.

Solución Óptima

Las decisiones óptimas $\hat{P}_\theta(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$, $\varphi_\theta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$ y $\phi_\theta(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ no dependen de la marginal. Es decir, la solución es la misma por más que cambie la marginal p_X .

Causal and Anticausal Learning

Causal Learning

Desde esta perspectiva, en una configuración causal $X \rightarrow Y$ no debería ayudarnos conocer p_X a inferir $p_{Y|X}$.

Solución Óptima

Las decisiones óptimas $\hat{P}_\theta(y|x) = P_{Y|X}(y|x)$, $\varphi_\theta(x) = \mathbb{E}[Y|X = x]$ y $\phi_\theta(x) = \arg \max_y P_{Y|X}(y|x)$ no dependen de la marginal. Es decir, la solución es la misma por más que cambie la marginal p_X .

Igual un poquito ayuda

La marginal p_X no influye en la mejor solución, pero si ayuda a definir que solución es mejor entre dos subóptimas. Por ejemplo:

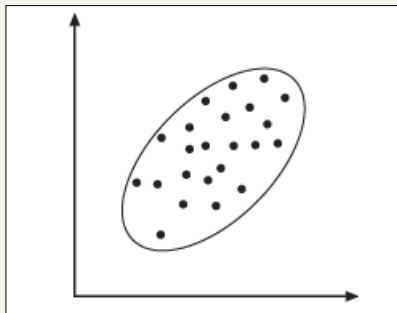
$$\arg \min_{\theta \in \Theta} \mathbb{E}[(Y - \varphi_\theta(X))^2] = \arg \min_{\theta \in \Theta} \mathbb{E}_{p_X}[(\varphi_\theta(X) - \mathbb{E}[Y|X])^2]$$

Outline

- 1 Autoencoders
- 2 Principal Components Analysis (PCA)
- 3 K-Means
- 4 Algoritmo EM
- 5 Factor Analysis

Principal Components Analysis

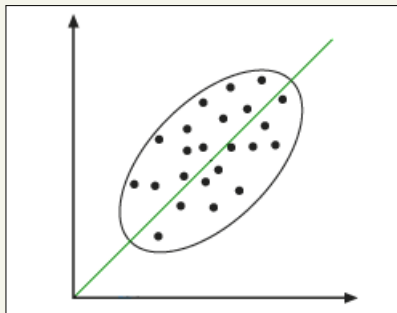
Reducción lineal



Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

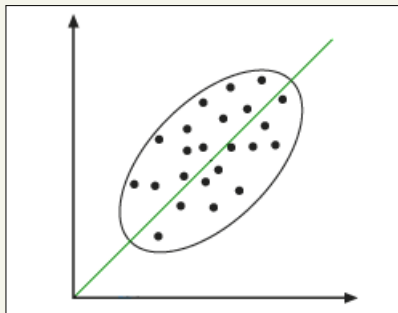
Reducción lineal



Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

Reducción lineal



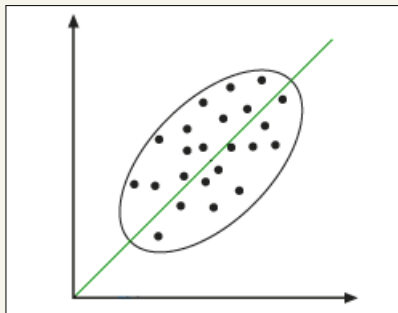
PASO 1: Normalizar

$$\tilde{x}_j^{(i)} = x_j^{(i)} - \mu_j$$

Adicionalmente se puede normalizarse en varianza también, pero solo si la interpretación de los resultados o la estabilidad numérica lo amerita.

Principal Components Analysis

Reducción lineal



PASO 1: Normalizar

$$\tilde{x}_j^{(i)} = x_j^{(i)} - \mu_j$$

Adicionalmente se puede normalizarse en varianza también, pero solo si la interpretación de los resultados o la estabilidad numérica lo amerita.

PASO 2: Buscar el principal autovector \mathbf{v}_1

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 \quad \text{con} \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0$$

Lectura recomendada: *Andrew Ng* - "Lecture notes: Principal components analysis".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condicion de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condicion de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Optimización:

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 = \min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}\|^2 - \alpha_i^2$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

Condición de ortogonalidad:

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1; \mathbf{v}_1 \rangle = 0 \quad \rightarrow \quad \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle = \alpha_i \|\mathbf{v}_1\|^2 = \alpha_i$$

Optimización:

$$\min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)} - \alpha_i \mathbf{v}_1\|^2 = \min_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \sum_{i=1}^n \|\tilde{\mathbf{x}}^{(i)}\|^2 - \alpha_i^2$$

$$\max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \langle \tilde{\mathbf{x}}^{(i)}; \mathbf{v}_1 \rangle^2 = \max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \mathbf{v}_1^T \underbrace{\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \tilde{\mathbf{x}}^{(i)} (\tilde{\mathbf{x}}^{(i)})^T \right)}_{\Sigma} \mathbf{v}_1$$

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \Sigma \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \Sigma \mathbf{v}_1 - \lambda \left(\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1 \right)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2\Sigma \mathbf{v}_1 - 2\lambda \mathbf{v}_1 = 0$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \Sigma \mathbf{v}_1 - \lambda (\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2\Sigma \mathbf{v}_1 - 2\lambda \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\Sigma \mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{v}_1 \quad \rightarrow \quad \mathbf{v}_1 \text{ es AVE de } \Sigma \text{ y } \lambda \text{ es AVA}$$

Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Algunas cuentas

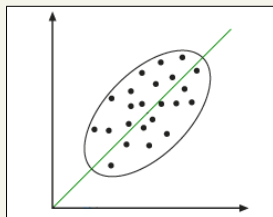
$$J(\mathbf{v}_1) = \mathbf{v}_1^T \Sigma \mathbf{v}_1 - \lambda (\mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 - 1)$$

$$\nabla J(\mathbf{v}_1) = 2\Sigma \mathbf{v}_1 - 2\lambda \mathbf{v}_1 = 0$$

$$\Sigma \mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{v}_1 \quad \rightarrow \quad \mathbf{v}_1 \text{ es AVE de } \Sigma \text{ y } \lambda \text{ es AVA}$$

El problema de optimización pasa a ser de la forma

$$\max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \mathbf{v}_1^T \Sigma \mathbf{v}_1 = \max_{\substack{\mathbf{v}_1: \\ \|\mathbf{v}_1\|^2=1}} \lambda(\mathbf{v}_1) \quad \rightarrow \quad \text{Máximo AVA}$$



Lectura recomendada: *Petersen and Pedersen* - "Matrix Cookbook".

Principal Components Analysis

Reducción y Reconstrucción

Componentes principales

Este procedimiento se puede repetir para encontrar el 2do, 3er, etc. componente principal. El resultado son el 2do, 3er, etc autovalor con su autovector como dirección.

Autoencoder

El encoder queda definido por $\mathbf{u} = \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{x}$ y el decoder por $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{u}$, donde \mathbf{V} es la matriz de autovectores más relevantes.

Energía

El porcentaje de energía perdida puede medirse por la proporción de autovalores despreciados (son no negativos).

Base Ortogonal

Por ser ortonormales $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$, pero solo en el caso de tener todos los autovectores $\mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$ (ya que la matriz \mathbf{V} será inversible).

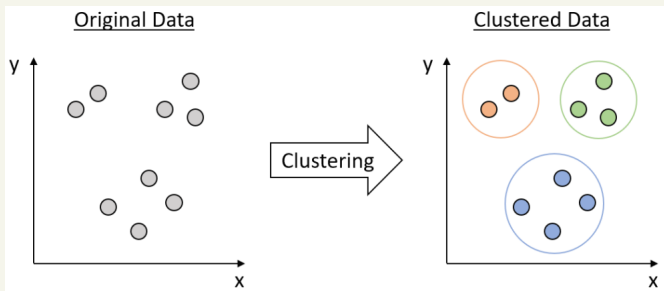
Outline

- 1 Autoencoders
- 2 Principal Components Analysis (PCA)
- 3 K-Means**
- 4 Algoritmo EM
- 5 Factor Analysis

Clustering

Clustering

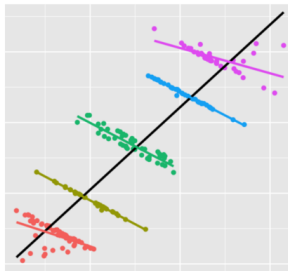
Estos algoritmos son la versión no supervisada de la clasificación. Su objetivo es agrupar muestras de manera de tener un mayor entendimiento del *manifold*.



Motivación: Paradoja de Simpson

Paradoja de Simpson

La paradoja de Simpson se da cuando dos (o más) variables tienen una correlación hacia un sentido pero al agrupar los datos se ve que, en cada cluster, la correlación posee en realidad el sentido opuesto.



Paradoja de Simpson: Covid-19 Case Fatality Rates (CFR)

Edad	0-9	10-19	20-29	30-39	40-49	50-59	60-69	70-79	≥ 80	Total
Italia	0% (0/43)	0% (0/85)	0% (0/296)	0% (0/470)	0.1% (1/891)	0.2% (3/1453)	2.5% (37/1471)	6.4% (114/1785)	13.2% (202/1532)	4.4% (357/8026)
China	0% (0/0)	0.2% (1/549)	0.2% (7/3619)	0.2% (18/7600)	0.4% (38/8571)	1.3% (130/10008)	3.6% (309/8583)	8% (312/3918)	14.8% (208/1408)	2.3% (1023/44672)

Julius von Kugelgen, Luigi Gresele and Bernhard Scholkopf "Simpson's paradox in Covid-19 case fatality rates: A mediation analysis of age-related causal effects" IEEE Transactions on Artificial Intelligence 2021.

Algoritmo K-Means

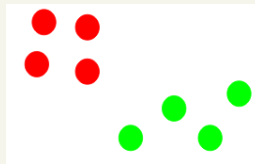
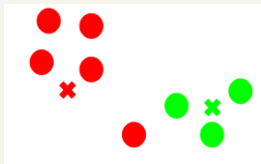
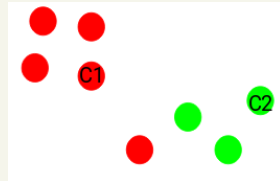
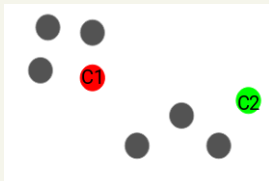
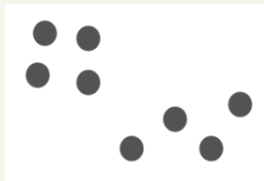
K-means

Algoritmo de clustering para agrupar los datos en K clusters (previamente definidos). Se basa en encontrar, de forma iterativa, los *centroides* de cada clase y asignar cada muestra al centroide más cercano.

Algorithm 1 K-means

- 1: **procedure** KMEANS(X, K)
 Input: $X \in \mathbb{R}^{n \times d_x}$ matriz de datos y K número de clusters.
 Output: $\mu \in \mathbb{R}^{K \times d_x}$ centroides e $y \in \{1, \dots, K\}^n$ etiquetas.
 - 2: Inicializar μ con el valor de K columnas de X elegida al azar.
 - 3: **repeat**
 - 4: $y[i] = \arg \min_k \|X[i, :] - \mu[k, :]\|$ ▷ Con $i = 1, \dots, n$.
 - 5: $\mu[k, :] = \mathbb{E}[X[y == k, :]]$ ▷ Con $k = 1, \dots, K$
 - 6: **until** convergencia
 - 7: **Return:** μ e y
 - 8: **end procedure**
-

Algoritmo K-Means



Autoencoder

En el contexto de autoencoder, el algoritmo de clustering hace las veces de encoder. En ese caso el decoder es simplemente devolver el centroide del cluster correspondiente.

Outline

- 1 Autoencoders
- 2 Principal Components Analysis (PCA)
- 3 K-Means
- 4 Algoritmo EM**
- 5 Factor Analysis

Máxima Verosimilitud

Algoritmos de Máxima Verosimilitud

La minimización de la *cross-entropy* equivale a encontrar algoritmos de máxima verosimilitud. El problema es que estos son muchas veces analíticamente intratables y computacionalmente muy pesados de tratar (ej. mezcla de gaussianas).

$$\hat{\theta} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \log p(X_i | \theta)$$

Variables no observable

Sea Z una variable no observable del problema con densidad condicional $p(z|x, \theta)$, y sea \mathcal{P} la familia de todas las posibles densidades condicionales de $Z|X = x$. Luego, el estimador de MV puede reescribirse como:

$$\begin{aligned} \hat{\theta} &= \arg \max_{\theta \in \Theta} \max_{q \in \mathcal{P}} \sum_{i=1}^n [\log p(X_i | \theta) - \text{KL}(q(\cdot | X_i) \| p(\cdot | X_i, \theta))] \\ &= \arg \max_{\theta \in \Theta} \max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta, q) \end{aligned}$$

Algoritmo EM

Algoritmo Expectation - Maximization

El algoritmo EM consiste en inicializar en algún valor θ_0 e iterar entre:

- $q^{(t)} = \arg \max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta^{(t-1)}, q)$ (Expectation)
- $\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \text{ELBO}(\theta, q^{(t)})$ (Maximization)

Algoritmo EM

Algoritmo Expectation - Maximization

El algoritmo EM consiste en inicializar en algún valor θ_0 e iterar entre:

- $q^{(t)} = \arg \max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta^{(t-1)}, q)$ (Expectation)
- $\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \text{ELBO}(\theta, q^{(t)})$ (Maximization)

Expectación

El paso *Expectation* puede simplificarse a la relación

$q^{(t)}(z|x) = p(z|x, \theta^{(t-1)})$. Es decir:

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \left[\log p(X_i|\theta) - \text{KL} \left(p(\cdot|X_i, \theta^{(t-1)}) \| p(\cdot|X_i, \theta) \right) \right]$$

Algoritmo EM

Maximización

El paso *Maximization* puede simplificarse reescribiendo cada sumando como

$$\log p(x|\theta) - \text{KL}(q(\cdot|x) || p(\cdot|x, \theta)) = H(q(\cdot|x)) + \mathbb{E}_q [\log p(x, Z|\theta) | X = x]$$

donde la entropía no depende de θ . Es decir,

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i, Z|\theta) | X_i]$$

Algoritmo EM

Maximización

El paso *Maximization* puede simplificarse reescribiendo cada sumando como

$$\log p(x|\theta) - \text{KL}(q(\cdot|x) \| p(\cdot|x, \theta)) = H(q(\cdot|x)) + \mathbb{E}_q [\log p(x, Z|\theta) | X = x]$$

donde la entropía no depende de θ . Es decir,

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i, Z|\theta) | X_i]$$

Teorema: Monotonía

En el algoritmo EM ocurre que

$$\sum_{i=1}^n \log p(X_i | \theta^{(t)}) \geq \sum_{i=1}^n \log p(X_i | \theta^{(t-1)})$$

Hint: Expectación + KL ≥ 0 .

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Definición del problema

Si $Z \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\})$ y $X|Z = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$, está claro que X es una mezcla de gaussianas. Sea $\theta = \{c_k, \mu_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K$, se desea estimar estos parámetros (de forma no supervisada, es decir siendo Z no observable). El estimador de máxima verosimilitud es intratable y por eso recurrimos al algoritmo EM.

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Definición del problema

Si $Z \sim \text{Cat}(\{c_1, \dots, c_K\})$ y $X|Z = k \sim \mathcal{N}(\mu_k, \Sigma_k)$, está claro que X es una mezcla de gaussianas. Sea $\theta = \{c_k, \mu_k, \Sigma_k\}_{k=1}^K$, se desea estimar estos parámetros (de forma no supervisada, es decir siendo Z no observable). El estimador de máxima verosimilitud es intratable y por eso recurrimos al algoritmo EM.

Expectación

El paso de expectación es simplemente elegir:

$$q(k|x) = p(k|x, \theta) = \frac{c_k \cdot |\Sigma_k|^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_k)^T \Sigma_k^{-1}(x-\mu_k)}}{\sum_{m=1}^K c_m \cdot |\Sigma_m|^{-1/2} \cdot e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_m)^T \Sigma_m^{-1}(x-\mu_m)}}$$

Clustering

En los modelos de mezcla (cuando Z es una variable categórica), se considera al algoritmo EM un método de *soft clustering*.

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Maximización

Dado un q , se desea maximizar:

$$\max_{\theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_q [\log p(X_i, Z|\theta)|X_i] \quad \text{s.t.} \quad \sum_{k=1}^K c_k = 1$$

Es decir que, utilizando multiplicadores de Lagrange, la función a derivar e igualar a cero es:

$$\mathcal{L}(\theta) = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^K q(k|x_i) \left[\log c_k - \frac{1}{2} \log |\Sigma_k| - \frac{1}{2} (x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k) \right] + \lambda \left(1 - \sum_{k=1}^K c_k \right)$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a c_k

Igualamos a cero la derivada respecto a c_k y usamos que $\sum_{k=1}^K c_k = 1$.

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial c_k} = \left(\sum_{i=1}^n \frac{q(k|x_i)}{c_k} \right) - \lambda = 0$$

$$\Rightarrow c_k = \frac{1}{\lambda} \sum_{i=1}^n q(k|x_i)$$

$$\Rightarrow c_k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n q(k|x_i)$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a μ_k

Igualamos a cero (vector) la derivada respecto a μ_k .

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \mu_k} &= \sum_{i=1}^n q(k|x_i) \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k) = 0 \\ \Rightarrow \mu_k &= \frac{\sum_{i=1}^n q(k|x_i) \cdot x_i}{\sum_{i=1}^n q(k|x_i)}\end{aligned}$$

Algoritmo EM para mezcla de gaussianas

Derivada respecto a μ_k

Igualamos a cero (vector) la derivada respecto a μ_k .

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \mu_k} &= \sum_{i=1}^n q(k|x_i) \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k) = 0 \\ \Rightarrow \mu_k &= \frac{\sum_{i=1}^n q(k|x_i) \cdot x_i}{\sum_{i=1}^n q(k|x_i)}\end{aligned}$$

Derivada respecto a Σ_k

Igualamos a cero (matriz) la derivada respecto a Σ_k .

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}(\theta)}{\partial \Sigma_k} &= \sum_{i=1}^n q(k|x_i) \left[-\frac{1}{2} \Sigma_k^{-1} + \frac{1}{2} \Sigma_k^{-1} (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T \Sigma_k^{-1} \right] = 0 \\ \Rightarrow \Sigma_k &= \frac{\sum_{i=1}^n q(k|x_i) \cdot (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T}{\sum_{i=1}^n q(k|x_i)}\end{aligned}$$

Algoritmo EM para máximo a posteriori

Estimador puntual con enfoque Bayesiano

Si modelamos θ como variable aleatoria y suponemos alguna distribución *a priori* $\pi(\theta)$, definimos el estimador MAP como:

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \arg \max_{\theta \in \Theta} \log p(\theta | \underline{X}) \\ &= \arg \max_{\theta \in \Theta} \log \pi(\theta) + \sum_{i=1}^n \log p(X_i | \theta) \\ &= \arg \max_{\theta \in \Theta} \log \pi(\theta) + \max_{q \in \mathcal{P}} \text{ELBO}(\theta, q)\end{aligned}$$

M-step

La prior solo modifica la maximización:

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \log \pi(\theta) + \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i, Z | \theta) | X_i]$$

Outline

- 1 Autoencoders
- 2 Principal Components Analysis (PCA)
- 3 K-Means
- 4 Algoritmo EM
- 5 Factor Analysis**

Aplicación de EM: Factor Analysis

Factor Analysis

Al igual que PCA, el algoritmo EM puede utilizarse para reducir la dimensión. El modelo consiste en suponer que los *features* se puede descomponer en factores: $X = \mu + W \cdot Z + \epsilon$ con $\mu \in \mathbb{R}^{d_x}$, $W \in \mathbb{R}^{d_x \times d_z}$, $Z \sim \mathcal{N}(0, I)$ (de dimensión d_z) y $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Psi)$ (de dimensión d_x) con Ψ una matriz diagonal y con Z y ϵ independientes. En este caso, $\theta = \{\mu, W, \Psi\}$.

Aplicación de EM: Factor Analysis

Factor Analysis

Al igual que PCA, el algoritmo EM puede utilizarse para reducir la dimensión. El modelo consiste en suponer que los *features* se puede descomponer en factores: $X = \mu + W \cdot Z + \epsilon$ con $\mu \in \mathbb{R}^{d_x}$, $W \in \mathbb{R}^{d_x \times d_z}$, $Z \sim \mathcal{N}(0, I)$ (de dimensión d_z) y $\epsilon \sim \mathcal{N}(0, \Psi)$ (de dimensión d_x) con Ψ una matriz diagonal y con Z y ϵ independientes. En este caso, $\theta = \{\mu, W, \Psi\}$.

Expectación

Dado que la conjunta entre (X, Z) es una normal multivariada, la condicional de $Z|X = x$ también lo será. Es decir que $p(z|x, \theta)$ se caracterizará por una media (recta función de x) y una matriz de covarianza constante (no depende de x).

Aplicación: Factor Analysis

Maximización

Como la marginal $p(Z)$ no depende de θ , la maximización se reduce a:

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i|Z, \theta)|X_i]$$

Aplicación: Factor Analysis

Maximización

Como la marginal $p(Z)$ no depende de θ , la maximización se reduce a:

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i|Z, \theta)|X_i]$$

Encoder - Decoder

Una vez entrenado el algoritmo, se utiliza $\mathbb{E}[Z|X = x, \theta]$ como *encoder* y $\mathbb{E}[X|Z = z, \theta]$ como *decoder*.

Aplicación: Factor Analysis

Maximización

Como la marginal $p(Z)$ no depende de θ , la maximización se reduce a:

$$\theta^{(t)} = \arg \max_{\theta \in \Theta} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}_{q^{(t)}} [\log p(X_i|Z, \theta)|X_i]$$

Encoder - Decoder

Una vez entrenado el algoritmo, se utiliza $\mathbb{E}[Z|X = x, \theta]$ como *encoder* y $\mathbb{E}[X|Z = z, \theta]$ como *decoder*.

Probabilistic PCA

Si en lugar de pedir que Ψ sea diagonal se pide que todas las varianzas coincidan $\Psi = \sigma^2 \mathbf{I}$, se obtiene un algoritmo conocido como Probabilistic PCA.

Esquema de despejes de ecuaciones

- 1 Hallar la distribución condicional de $X|Z = z$.
- 2 Hallar la distribución marginal de X .
- 3 Hallar la distribución conjunta de (X, Z) .
- 4 E-Step (los parámetros se asumen conocidos y se calcula la distribución): Hallar la distribución condicional de $Z|X = x$. Bautizar a los principales momentos: $m_i = \mathbf{E}[Z|X = x_i]$, $\Sigma_i = \text{var}(Z|X = x_i)$.
- 5 M-Step (la distribución anterior se asume conocida y se calculan los parámetros): Calcular la esperanza de $\log(p(X|Z, \theta))$, bajo $Z|X$.
- 6 Plantear la función a maximizar.
- 7 Para simplificar el análisis asumir que $\mu = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$ (no varía en las iteraciones). ¿Puede decir algo sobre $\sum_{i=1}^n m_i$?
- 8 Derivar respecto de W e igualar a cero. Despejar W .
- 9 Derivar respecto de Ψ e igualar a cero. Despejar Ψ .

Petersen and Pedersen - "Matrix Cookbook" (tenerlo a mano en todo el momento).
Andrew Ng - "Lecture notes: Factor Analysis" (chequear resultados).